

Ultima revisione: 05 febbraio 2008.

CURRICULUM DELL'ATTIVITA' SCIENTIFICA E DIDATTICA DEL PROF. M. STENER

Il Prof. Mauro Stener, nato a Trieste il 13 giugno 1967, ha conseguito il diploma di Maturita' Scientifica presso il Liceo Scientifico G. Galilei di Trieste nel luglio 1986 con la votazione di 60/60. Si e' quindi iscritto al Corso di Laurea in Chimica presso l'Universita' di Trieste dove ha seguito un piano di studi a carattere chimico-fisico. Si e' laureato in Chimica il 13 marzo 1992 presso l'Universita' di Trieste con il punteggio di 110/110 e lode discutendo una tesi in chimica-fisica dal titolo: "Analisi teorica e sperimentale dell'omopolimerizzazione in emulsione" (relatore: Prof. N. Rahman).

Dopo aver conseguito la Laurea ha lavorato come tecnico per 3 mesi presso l'ICC (International Institute for Pure and Applied Chemistry - Area di Ricerca - Trieste) dove ha proseguito il lavoro iniziato con la Tesi di Laurea. In questo ambito ha partecipato ad una scuola internazionale in "Polimerization Reaction Engineering" a Bratislava.

Nel dicembre 1992 e' risultato vincitore della borsa di studio per il Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche (VIII Ciclo) con sede amministrativa Trieste, ed ha quindi iniziato a svolgere l'attivita' di ricerca nell'area Chimica Teorica (relatore: Prof. P. Decleva). La tematica di ricerca sviluppata nel corso del dottorato consiste nell'applicazione della teoria del funzionale densita' a stati elettronici eccitati di atomi e molecole. Sono state studiate le energie di ionizzazione e di eccitazione e le intensita' di tali processi, cioe' rispettivamente le sezioni d'urto e le forze dell'oscillatore. Il calcolo delle sezioni d'urto ha richiesto l'uso della tecnica di Stieltjes Imaging per il caso molecolare mentre nel caso atomico e' stata impiegata la funzione d'onda nel continuo. Inoltre, limitatamente agli atomi, sono stati effettuati calcoli con la teoria del funzionale densita' dipendente dal tempo (TDLDA) e con accurate espansioni in base di B-splines. Durante il periodo del dottorato il dr. Stener ha partecipato ad una Scuola NATO sulla teoria del funzionale densita', ad una scuola SCI su calcoli quantomeccanici su sistemi cristallini ed a due congressi internazionali sulle applicazioni in chimica ed in fisica del funzionale densita'.

Il Prof. Stener ha regolarmente terminato il periodo di frequenza del Dottorato di Ricerca il 31 ottobre 1995 ed in data 31 ottobre 1996 ha superato l'esame finale per il conseguimento del Titolo di Dottore di Ricerca.

Dal 1 novembre 1995 il Prof. Stener ha fruito di una borsa di studio annuale di post-dottorato (scadenza 31 ottobre 1996) nell'ambito del programma "Human Capital Mobility" dell'Unione Europea (contratto EU Projekt ERB-CHRX-CT 94-0532) presso l'istituzione estera denominata: "Lehrstuhl für Theoretische Chemie - Technischen Universität München" (Cattedra di Chimica Teorica dell'Università Tecnica di Monaco - Germania), titolare della cattedra: Prof. Dr. Notker Rösch. In questa sede estera il Prof. Stener ha svolto un'attività di ricerca di chimica teorica basata sulla teoria del funzionale densità relativistico. Durante questo periodo il Prof. Stener ha tenuto 5 seminari in lingua inglese, aventi per argomento il metodo TDLDA e l'applicazione della Teoria del Funzionale Densità ai cluster metallici.

Dal 1 novembre 1996 il Prof. Stener ha ripreso a frequentare regolarmente il Dipartimento di Scienze Chimiche dell'Università di Trieste, dove svolge attualmente un'attività di ricerca basata sulla teoria del funzionale densità (LDA e TDLDA) applicata a processi di fotoemissione e fotoassorbimento. Durante questo periodo il Prof. Stener ha partecipato ad un congresso della divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana (Pisa 1997) ed ad un congresso internazionale sulle applicazioni in chimica ed in fisica del funzionale densità.

A decorrere dal 6 aprile 1998, il Prof. Stener è stato nominato ricercatore universitario per il settore scientifico-disciplinare C02X - Chimica fisica presso la Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali dell'Università di Trieste, in quanto vincitore di concorso. Nell'anno 2001 il Prof. Stener è stato confermato in ruolo come Ricercatore Confermato.

Nell'anno 2006 il Prof. Stener ha conseguito l'idoneità a Professore Associato, avendo partecipato ad una valutazione comparativa bandita dall'Università "Tor Vergata" di Roma. Successivamente è stato chiamato dalla Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali dell'Università di Trieste, dove ha preso servizio come Professore Associato il 1 dicembre 2006 e ricopre attualmente tale posizione.

I risultati ottenuti dall'attività di ricerca sono stati raccolti finora in 94 pubblicazioni ed in 58 comunicazioni a congressi.

ELENCO DELLE DISSERTAZIONI SCRITTE DEL DR. MAURO STENER

1) Tesi di Laurea in chimica intitolata: "Analisi teorica e sperimentale dell'omopolimerizzazione in emulsione" (relatore: Prof. N. Rahman), Università degli Studi di Trieste, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Anno Accademico 1990 - 1991.

2) Tesi di Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche intitolata: "Descrizione di fenomeni di fotoassorbimento e fotoemissione con la teoria del funzionale densità", relatore: Prof. P. Decleva, Università degli Studi di Trieste, VIII Ciclo, Anni Accademici 1992-93, 1993-94, 1994-95.

PARTECIPAZIONI A CONGRESSI DEL DR. M. STENER

- 1) Training Course "Polymerization Reaction Engineering", Joint European Project 1125, Papiernicka (Bratislava) Cecoslovacchia, 14-21 giugno 1992.
- 2) NATO ASI on "Density Functional Theory", Il Ciocco, Castelvechio Pascoli (Lucca), 15-27 agosto 1993.
- 3) "5th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics", Villa Olmo, Como 13-16 settembre 1993.
- 4) IV scuola di chimica computazionale "Calcolo quanto-meccanico di proprieta' chimico fisiche dei materiali cristallini", Villa Gualino, Torino 19-24 settembre 1994.
- 5) "6th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics", Parigi, 29 agosto - 1 settembre 1995.
- 6) "XXVIII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Societa' Chimica Italiana", Pisa, 10 - 14 febbraio 1997.
- 7) "7th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics", Vienna, 2 - 6 settembre 1997.
- 8) "Chemistry Meeting - Universities of Ljubljana, Trieste and Zagreb", Trieste, 1 - 2 luglio 1998.
- 9) "XXIX Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Societa' Chimica Italiana", Taormina, 5 - 9 ottobre 1998.
- 10) "8th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory to Chemistry and Physics", Roma, 6 - 10 settembre 1999.
- 11) "XXX Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Societa' Chimica Italiana", Firenze, 26 settembre – 1 ottobre 1999.

12) "Xth International Congress of Quantum Chemistry", Mentone (Francia) 5-10 giugno 2000

13) "XXXI Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana", Padova, 19-23 giugno 2001

14) "Thirteenth International Conference on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics (VUV-XIII)", Trieste, 23-27 luglio 2001.

15) "9th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory to Chemistry and Physics", Madrid, 10 - 14 settembre 2001.

16) "Fourth Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics", Marly-le-Roi (Parigi) , Francia, 9 – 16 luglio 2002.

17) "XXI Congresso della Società Chimica Italiana", Torino, 22-27 giugno 2003.

18) GICC2003, V Edizione del Congresso del Gruppo Italiano di Chimica Computazionale, Certosa di Pontignano, Siena, 18-19 dicembre 2003.

19) Divisione di Chimica Fisica - Società Chimica Italiana, XXXIII Congresso Nazionale, 21 - 25 Giugno 2004, Napoli - Complesso Universitario di Monte S. Angelo.

20) "11th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory to Chemistry and Physics", Geneve, 11 - 15 September 2005, (poster).

21) XIII Elettra Users' Meeting, Satellite Workshop "Computer Simulations of Surface and Interface Phenomena", Trieste, 15-16 December 2005 (poster)

22) DFTEM2006 - International Conference on Density Functional Theory (DFT) and Transmission Electron Microscopy (TEM), Vienna, April 21 - 23, 2006

23) GICC2006, VI Convegno nazionale del Gruppo Interdivisionale di Chimica Computazionale, Isola di San Servolo, Venezia 18-21 dicembre 2006

COMUNICAZIONI A CONGRESSI DEL DR. M. STENER

1) M. Stener, P. Decleva and A. Lisini, "Theoretical Studies of Photoexcitation and Photoionization by X Hartree-Fock-Slater Approach in Atoms and Molecules", NATO ASI on "Density Functional Theory", Il Ciocco, Castelvechio Pascoli (Lucca), 15 - 27 agosto 1993.

2) M. Stener, P. Decleva and A. Lisini, "Theoretical Studies of Photoexcitation and Photoionization by X Hartree-Fock-Slater Approach in Atoms and Molecules", "5th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics", Villa Olmo, Como 13-16 settembre 1993.

3) M.Stener, P. Decleva and A. Lisini, "Stieltjes Imaging photoionization cross sections by large basis set LCAO density functional calculation", Il convegno nazionale di informatica chimica, CINECA, Casalecchio di Reno, Bologna, 16-18 febbraio 1994.

4) P. Decleva, A. Lisini, M. Stener and G. Fronzoni, "Theoretical Study of inner shell absorption spectra in transition metal compounds", Secondo convegno SILS (Societa' Italiana Luce di Sincrotrone), Universita' di Roma "Tor Vergata", Roma 20-21 giugno 1994.

5) M.Stener, P. Decleva and A. Lisini, "Stieltjes Imaging photoionization cross sections by large basis set LCAO density functional calculation", Secondo convegno SILS (Societa' Italiana Luce di Sincrotrone), Universita' di Roma "Tor Vergata", Roma 20-21 giugno 1994.

6) P. Decleva, A. Lisini, M. Stener and G. Fronzoni, " Theoretical Study of inner shell absorption spectra in transition metal compounds", Secondo convegno INCM (consorzio interuniversitario nazionale per la chimica dei materiali), Firenze 13-15 febbraio 1995.

7) M. Stener, P. Decleva and A. Lisini, " Cross sections calculations by the LDA and TDLDA approaches", ICES-6, 6th International Conference on Electron Spectroscopy, Roma 19-23 giugno 1995.

8) M. Stener, P. Decleva and A. Lisini, " Cross sections calculations by the LDA and TDLDA approaches", XVIII congresso nazionale societa' chimica italiana, Milano 28 agosto- 1 settembre 1995.

9) M. Stener, P. Decleva and A. Lisini, "Density functional and ab-initio calculations of core excitation spectra", "6th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics", Parigi, 29 agosto - 1 settembre 1995.

10) M. Stener, P. Decleva and A. Lisini, "Density functional - time dependent local density approximation calculations of autoionization resonances in noble gases", "6th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics", Parigi, 29 agosto - 1 settembre 1995.

11) O. D. Häberlen, S. C. Chung, M. Stener and N. Rösch, "Dai cluster allo stato solido. Studio di una serie di cluster di oro Au_n , $n = 6 \dots 147$ con il metodo del funzionale densita' relativistico", "XXVIII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Societa' Chimica Italiana", Pisa, 10 - 14 febbraio 1997.

12) M. Stener, G. De Alti, G. Fronzoni and P. Decleva, "TDLDA calculations of photoionization cross-section and asymmetry parametr profiles of alkaline-earth atoms", "7th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics", Vienna, 2 - 6 settembre 1997.

13) P. Decleva and M. Stener, "Molecular photoionization cross-section profiles and asymmetry parameter from B-spline LDA calculations", "7th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics", Vienna, 2 - 6 settembre 1997.

14) M. Stener, "Theoretical Methods of Molecular Photoionization", "Chemistry Meeting - Universities of Ljubljana, Trieste and Zagreb", Trieste, 1 - 2 luglio 1998.

15) M. Stener, M. Venuti e P. Decleva, "Calcolo di orbitali molecolari dello spettro continuo con un metodo funzionale densità in una base di B-splines", "XXIX Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana", Comunicazione Orale, Taormina (ME), 5 - 9 ottobre 1998.

16) M. Stener, G. Fronzoni, S. Furlan and P. Decleva, "Photoionization by TD-DFT and exchange correlation potential with correct asymptotic behaviour", "8th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory to Chemistry and Physics", Roma, 6 - 10 settembre 1999.

17) P. Decleva, G. Fronzoni, M. Stener and G. De Alti, "Photoionization of C_{60} and $M@C_{60}$ by large scale LDA continuum calculations", "8th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory to Chemistry and Physics", Roma, 6 - 10 settembre 1999.

18) G. Fronzoni, M. Stener and P. Decleva, "Studio teorico degli spettri NEXAFS Cl 1s e 2p di Cl_2 , ClF e ClF_3 ", "XXV Congresso Internazionale dei Chimici Teorici di Espressione Latina", Napoli, 13 – 18 settembre 1999.

19) M. Stener, G. Fronzoni, S. Furlan and P. Decleva, "Photoionization by TD-DFT and exchange correlation potential with correct asymptotic behaviour", "XXX Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana", Firenze, 26 settembre – 1 ottobre 1999.

20) P. Decleva, G. Fronzoni, M. Stener and G. De Alti, "Photoionization of C_{60} and $M@C_{60}$ by large scale LDA continuum calculations", "XXX Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana", Firenze, 26 settembre – 1 ottobre 1999.

21) M. Stener and P. Decleva, "Time – Dependent Density Functional calculations of molecular photoionization cross section: N_2 and PH_3 ", "Xth International Congress of Quantum Chemistry", Mentone (Francia) 5-10 giugno 2000.

22) P. Decleva, P. Colavita, G. Fronzoni and M. Stener, "DFT calculations of photoionization of C_{60} and $M@C_{60}$ ", "Xth International Congress of Quantum Chemistry", Mentone (Francia) 5-10 giugno 2000.

23) G. Fronzoni, M. Stener and P. Decleva , “Theoretical study of photoionization processes in organometallic compounds”, “XXXI Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana”, Padova, 19-23 giugno 2001.

24) M. Stener, G. Fronzoni and P. Decleva, “Calculations of photoemission profiles of C₆₀ and endohedral compounds”, “XXXI Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana”, Padova, 19-23 giugno 2001.

25) G. Fronzoni, M. Stener and P. Decleva , “Theoretical study of photoionization processes in organometallic compounds”, “Thirteenth International Conference on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics (VUV-XIII)”, Trieste, 23-27 luglio 2001.

26) M. Stener, G. Fronzoni and P. Decleva, “Calculations of photoemission profiles of C₆₀ and endohedral compounds”, “Thirteenth International Conference on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics (VUV-XIII)”, Trieste, 23-27 luglio 2001.

27) M. Stener, G. Fronzoni, and P. Decleva, ”Time Dependent Density Functional B-spline calculation of molecular photoionization”, "9th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory to Chemistry and Physics", Madrid, 10 - 14 settembre 2001.

28) P. Decleva, G. Fronzoni, and M. Stener, “Valence and core photoemission in M@C₆₀ (M = Be, Mg, Ca)”, “19th International Conference on X-ray and Inner-Shell Processes”, Università di Roma “La Sapienza”, 24 – 28 giugno 2002.

29) M. Stener, G. Fronzoni, and P. Decleva, “Photoionization of oriented molecules: a time dependent density functional approach”, “19th International Conference on X-ray and Inner-Shell Processes”, Università di Roma “La Sapienza”, 24 – 28 giugno 2002.

30) M. Stener and G. Fronzoni, ”Time Dependent Density Functional B-spline calculation of molecular photoionization”, “Fourth Congress of the International

Society for Theoretical Chemical Physics”, Marly-le-Roi (Parigi) , Francia, 9 – 16 luglio 2002.

31) G. Fronzoni and M. Stener, “TD-DFT calculations of core excitations in large systems”, “Fourth Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics”, Marly-le-Roi (Parigi) , Francia, 9 – 16 luglio 2002.

32) Corrado Crotti, Teresa Celestino, Erica Farnetti, Mauro Stener and Stefano Fontana, “Synchrotron radiation photoemission study of tungsten carbonyl complexes”, XXX Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Inorganica della Societa’ Chimica Italiana, Modena 15 – 19 settembre 2002.

33) Tsutomu Watanabe and Mauro Stener, “Penning Ionization of Axial Symmetric Molecules by Optically Allowed Excited Atoms”, The Vth Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics, Nara-ken New Public Hall, Nara, Japan 2-5 October, 2002.

34) M. Stener, “Descrizione teorica della fotoemissione e del fotoassorbimento di atomi e molecole”, "incontro scientifico COFIN", Universita’ di Siena 25 – 26 ottobre 2002, comunicazione orale.

35) M. Stener, G. Fronzoni and P. Decleva, “Descrizione della fotoionizzazione molecolare a livello DFT con funzioni di base B-spline”, “XXI Congresso della Societa’ Chimica Italiana”, Torino, 22-27 giugno 2003.

36) J. Schiessling, M. Stener, L. Kjeldgaard, T. Balasubramanian, P. Decleva, J. Nordgren and P. A. Brühwiler, “Angular Effects in Photoelectron Spectra of Solid and Monolayer C₆₀”, ICESS-9 (International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure), Uppsala (Svezia), 30 giugno – 4 luglio 2003.

37) M. Alagia, G. Contini, P. Decleva, G. Fronzoni, T. Prosperi, R. Richter, M. Stener, S. Stranges, S. Turchini and N. Zema, “Photoionization of chiral, radical and

transient free molecules at ELETTRA”, ICESS-9 (International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure), Uppsala (Svezia), 30 giugno – 4 luglio 2003.

38) M. Stener, G. Fronzoni and A. Reduce, “Studio TDDFT delle eccitazioni di core in modelli molecolari della solfito ossidasi ”, GICC2003, V Edizione del Congresso del Gruppo Italiano di Chimica Computazionale, Certosa di Pontignano, Siena, 18-19 dicembre 2003, comunicazione orale.

39) M. Stener, “Time dependent density functional theory of core electron excitations”, DEMOCRITOS INFORMAL SEMINAR, SISSA, Trieste, 12 febbraio 2004.

40) J. Schiessling, M. Stener , T. Balasubramanian , L. Kjeldgaard, P. Decleva, J. Nordgren and P. A. Brühwiler, “Identification of molecular orbital components of C60 on Al(110)”, “205th Meeting of The Electrochemical Society”, 9–14 May 2004, San Antonio, Texas, USA, comunicazione orale.

41) S. Turchini, N. Zema, G. Contini, G. Alberti, M. Alagia, S. Stranges, G. Fronzoni, M. Stener, P. Decleva and T. Prosperi
"Circular Dichroism in the Angular Distribution of Photoelectrons from Chiral Molecules: Experiment and Theory on R(+) and S(-) Methyl-oxiranes"
INFMEETING 2004, Convegno nazionale per la Ricerca Interdisciplinare in Fisica della materia (CNR-INFM), Genova 8-10 giugno 2004, poster.

42) M. Stener, R. De Francesco, G. Fronzoni
“Eccitazioni di core in ossidi metallici: studio TDDFT con modelli a cluster”
Divisione di Chimica Fisica - Società Chimica Italiana, XXXIII Congresso Nazionale, 21 - 25 Giugno 2004, Napoli - Complesso Universitario di Monte S. Angelo, poster.

43) M. Stener,
“ Photoionization of large polyatomic molecules and clusters (Theory)”
3rd meeting of the COST working group D26/0002/02: “B-spline basis sets in laser-molecule interactions: ionisation and active control of chemical reactions”, Università di Trieste, Italy, 1 and 2 October 2004, comunicazione orale.

44) M. Stener

“Density Functional Theory of Photoionization”

Nottingham University (England), 3 novembre 2004, seminario su invito.

45) M. Stener

“Quantum chemistry approaches to predict ion fragmentation in the gas phase”,

Shimadzu Research Laboratory (Europe)LTD., Manchester, England, 5 novembre 2004, seminario su invito.

46) M. Stener, R. De Francesco, G. Fronzoni

"Eccitazioni di core in ossidi metallici: studio TDDFT con modelli a cluster"

III Scuola Nazionale in Simulazioni Computazionali Multiscala Applicate alle Scienze dei Materiali, 14-18 febbraio 2005, Modena - Università di Modena e Reggio Emilia (poster)

47) M. Stener

"Molecular Photoionization: a density functional approach with applications to circular dichroism in photoelectron angular distribution"

International Networking for Young Scientists: "Chirality in Molecular Physics"

British Council, Paris, France, 7-11 March 2005 (invited talk)

48) S. Coriani, P. Decleva, G. Fronzoni, M. Stener, R. De Francesco, D. Di Tommaso e D. Toffoli,

"Struttura elettronica e spettri di eccitazione di cluster finiti"

Workshop presentazione Centro Interdipartimentale per le Scienze Computazionali (CISC)

Universita' di Trieste, 15 giugno 2005 (talk)

49) M. Stener, G. Fronzoni and P. Decleva

"Time Dependent Density Functional Theory for molecular photoionization with non-iterative algorithm and multicenter B-spline basis set: implementation and applications",

"11th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory to Chemistry and Physics", Geneve, 11 - 15 September 2005, (poster).

50) G. Fronzoni, R. De Francesco, M. Stener and M. Causà,

"Time Dependent Density Functional Theory of X-ray absorption spectroscopy of metal oxides",

"11th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory to Chemistry and Physics", Geneve, 11 - 15 September 2005, (poster).

51) D. Di Tommaso, M. Stener and P. Decleva

" Calculation of the Circular Dichroism in the photoelectron Angular Distribution with the LCAO B-spline DFT method"

"11th International Conference On the Applications of the Density Functional Theory to Chemistry and Physics", Geneve, 11 - 15 September 2005, (poster).

52) M. Stener e G. Fronzoni

"Time Dependent DFT per lo studio di sistemi estesi" (talk)

Presentazione SeaSandS 19-20 dicembre 2005, Dip. di Chimica Università Federico II, Complesso Universitario Monte Sant'Angelo, Napoli.

53) G. Fronzoni, R. De Francesco, M. Stener and M. Causa'

"Time Dependent Density Functional Theory of X-ray absorption spectroscopy of metal oxides"

XIII Elettra Users' Meeting, Satellite Workshop "Computer Simulations of Surface and Interface Phenomena", Trieste, 15-16 December 2005 (poster)

54) G. Fronzoni, R. De Francesco, M. Stener and M. Causa'

"X-Ray absorption spectroscopy of alkaline-earth and transition metal oxides by Time Dependent Density Functional Theory"

DFTEM2006 - International Conference on Density Functional Theory (DFT) and Transmission Electron Microscopy (TEM), Vienna, April 21 - 23, 2006

55) G. Fronzoni, R. De Francesco e M. Stener

"Calcoli TDDFT di eccitazioni di core in ossidi metallici e molecole adsorbite su superfici"

GICC2006, VI Convegno nazionale del Gruppo Interdivisionale di Chimica Computazionale, Isola di San Servolo, Venezia 18-21 dicembre 2006 (comunicazione orale).

56) M. Stener, A. Nardelli, R. De Francesco and G. Fronzoni

"Valence electron excitations in gold clusters: a scalar relativistic TDDFT study"

GICC2006, VI Convegno nazionale del Gruppo Interdivisionale di Chimica Computazionale, Isola di San Servolo, Venezia 18-21 dicembre 2006 (poster).

57) M. Stener, M. Causà, R. De Francesco, G. Fronzoni, A. Nardelli

"Core and valence TDDFT studies on bulk, nanostructured materials and surface adsorbed molecules"

INSTM2007, VI Convegno nazionale sulla Scienza e tecnologia dei materiali, Universita' degli Studi di Perugia, Aula Magna, 12-15 Giugno 2007 (poster).

58) M. Stener

"Applications of TDDFT to material science: core electron excitations of bulk materials and optical spectra of gold nanoparticles"

NNL (National Nanotechnology Laboratories) of CNR-INFM, Universita' degli Studi di Lecce, 20 giugno 2007, seminario su invito.

ELENCO DELLE PUBBLICAZIONI DEL DR. MAURO STENER

- 1) P. Decleva, G. Fronzoni, A. Lisini and M. Stener,
"Molecular orbital description of core excitation spectra in transition metal compounds. An ab-initio CI calculation on TiCl_4 and isoelectronic molecules.",
Chem. Phys., 186 (1994) 1.
- 2) M. Stener, A. Lisini and P. Decleva,
"LCAO density functional calculations of core binding energy shifts of large molecules",
J. Electron Spectrosc. and Related Phenom., 69 (1994) 197.
- 3) M. Stener, A. Lisini and P. Decleva,
"Accurate local density photoionization cross sections by LCAO Stieltjes Imaging approach",
Int. J. Quantum Chem., 53 (1995) 229.
- 4) M. Stener, A. Lisini and P. Decleva,
"Density Functional calculations of excitations energies and oscillator strengths for $\text{C}1s \rightarrow \pi^*$ and $\text{O}1s \rightarrow \pi^*$ excitations and ionization potentials in carbonyl containing molecules.",
Chem. Phys., 191 (1995) 141.
- 5) M. Stener, P. Decleva and A. Lisini,
"Molecular photoionization cross sections by the local density LCAO Stieltjes Imaging approach",
J. Electron Spectrosc. and Related Phenom., 74 (1995) 29.
- 6) M. Stener, P. Decleva and A. Lisini,
"Calculations of giant resonances and cross section profiles of valence ionizations of cubane by LCAO density functional Stieltjes imaging approach",
J. of Molecular Structure (Theochem) 357 (1995) 125.

- 7) M. Stener, P. Decleva and A. Lisini,
"Density Functional - Time Dependent Local Density Approximation Calculations of Autoionization Resonances in Noble Gases",
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 28 (1995) 4973
- 8) U. Heiz, A. Vayloyan, E. Schumacher, C. Yeretjian, M. Stener, P. Gisdakis and N. Rösch,
"Na_xAu and Cs_xAu bimetal clusters: Finite size analogs of sodium-gold and cesium-gold compounds"
J. Chem. Phys., 105 (1996) 5574
- 9) G. Fronzoni, M. Stener, A. Lisini and P. Decleva,
"Ab initio and density functional calculations of core excitation spectra of CO, H₂CO and F₂CO"
Chem. Phys. 210 (1996) 447.
- 10) O. D. Häberlen, S. C. Chung, M. Stener and N. Rösch,
"From Clusters to Bulk. A Relativistic Density Functional Investigation on a series of Gold Clusters Au_n, n = 6 ... 147."
J. Chem. Phys., 106 (1997) 5189.
- 11) M. Stener, G. De Alti, G. Fronzoni and P. Decleva
"TDLDA Calculations of Photoionization Cross Section and Asymmetry Parameter Profiles of Alkaline-Earth Atoms"
Chem. Phys., 222 (1997) 197.
- 12) M. Stener and P. Decleva
"Photoionization of Zinc by TDLDA calculations"
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 30 (1997) 4481.
- 13) G. Fronzoni, M. Stener, P. Decleva and G. De Alti
"Theoretical study of the Cl 1s and 2p near edge photoabsorption spectra of HCl by accurate ab-initio CI and density functional approaches"
Chem. Phys., 232 (1998) 9.

- 14) M. Stener and P. Decleva
"Photoionization of first and second row hydrides by the B-spline one-centre expansion density functional method"
J. of Electron Spectrosc. and Related Phenom, 94 (1998) 195.
- 15) M. Venuti, M. Stener and P. Decleva
"Valence photoionization of C₆H₆ by the B-spline one-centre expansion density functional method"
Chem. Phys., 234 (1998) 95.
- 16) J. Sinzig, L. J. de Jongh, A. Ceriotti, R. della Pergola, G. Longoni, M. Stener, K. Albert and N. Rösch,
"Molecular magnetic quantum dots in multivalent metal cluster compounds"
Phys. Rev. Lett. , 81 (1998) 3211.
- 17) M. Stener, G. De Alti and P. Decleva
"Convergence of density functional one-centre expansion for the molecular continuum: N₂ and (CH₃)₃N"
Theoretical Chemistry Accounts (Theor. Chim. Acta), 101 (1999) 247.
- 18) M. Stener, K. Albert and N. Rösch,
"Relativistic density functional study on the bimetallic cluster [Pt₃Fe₃(CO)₁₅]ⁿ⁻ (n = 0, 1, 2)"
Inorganica Chimica Acta, 286 (1999) 30.
- 19) M. Stener and P. Decleva.
"Photoionization of CH₄, SiH₄, BH₃ and AlH₃ by the B-spline one-centre expansion density functional method",
J. of Electron Spectrosc. and Related Phenom, 104 (1999) 135.
- 20) G. Fronzoni, M. Stener and P. Decleva,
"Theoretical study of the excited and continuum states in the NEXAFS region of Cl₂",
Phys. Chem. Chem. Phys., 1 (1999) 1405.

- 21) G. Fronzoni, M. Stener and P. Decleva,
"Theoretical description of the NEXAFS Cl 1s and 2p spectra of ClF and ClF₃",
Chem. Phys., 246 (1999) 127.
- 22) M. Venuti, M. Stener, G. De Alti and P. Decleva,
"Photoionization of C₆₀ by large scale one-centre density functional explicit
continuum wave-function",
J. Chem. Phys., 111 (1999) 4589.
- 23) M. Stener, G. Fronzoni, M. Venuti and P. Decleva
"Photoionization of M@C₆₀ (M = Li, Na, K) by large scale one-centre density
functional explicit continuum wave-function",
Chem. Phys. Lett., 309 (1999) 129.
- 24) P. Decleva, G. De Alti, G. Fronzoni and M. Stener
"Theoretical study of resonances in the metal core photoionization of M@C₆₀ (M =
Li, Na, K)",
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 32 (1999) 4523.
- 25) M. Stener and M. Calligaris,
"Density functional study of structural properties and binding energies of
dimethylsulfoxide Ru(II) complexes",
J. of Molecular Structure (Theochem), 497 (2000) 91.
- 26) M. Stener, S. Furlan and P. Decleva
"Density Functional calculations of photoionization with an exchange – correlation
potential with the correct asymptotic behaviour",
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 33 (2000) 1081.
- 27) M. Stener and P. Decleva
"Time-Dependent Density Functional calculations of molecular photoionization cross
sections: N₂ and PH₃"
J. Chem. Phys., 112 (2000) 10871.

- 28) S. Krüger, M. Stener, M. Mayer, F. Nörtemann and N. Rösch
"Gold-Thiolate Complexes: a Density Functional Study of Geometry and Electronic Structure"
J. of Molecular Structure (Theochem), 527 (2000) 63.
- 29) M. Stener, S. Furlan and P. Decleva
"Density functional calculations of valence and core photoionization of C_6H_6 with an exchange-correlation potential with the correct asymptotic behaviour"
Phys. Chem. Chem. Phys. 3 (2001) 19.
- 30) M. Stener, G. Fronzoni, S. Furlan and P. Decleva
"Photoionization of $[(\eta-C_6H_6)_2Cr]$ with the explicit continuum B-spline density functional method"
J. Chem. Phys., 114 (2001) 306.
- 31) Sven Krüger, Mauro Stener and Notker Rösch
"Relativistic Density Functional Study of Gold Coated Magnetic Nickel Clusters"
J. Chem. Phys., 114 (2001) 5207.
- 32) M. Stener, P. Decleva and A. Görling
"The role of exchange and correlation in time-dependent density-functional theory for photoionization"
J. Chem. Phys. 114 (2001) 7816.
- 33) Elisabetta Iengo, Ennio Zangrando, Stefano Mestroni, Giovanna Fronzoni, Mauro Stener and Enzo Alessio,
"Complexed bridging ligands: oxorhenium(V) compounds with mono-coordinated pyrazine or pyrimidine as versatile building-blocks for the construction of polynuclear architectures"
J. Chem. Soc., Dalton Trans., 8 (2001) 1338.

- 34) M. Stener, P. Decleva, I. Cacelli, R. Moccia and R. Montuoro
"Response function study of CO photoionization: ab-initio SCF and density functional results"
Chem. Phys., 272 (2001) 15.
- 35) G. Fronzoni, P. Colavita, M. Stener, G. De Alti, and P. Decleva,
"Theoretical study of photoionization processes in $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$ "
J. Phys. Chem. A 105 (2001) 9800.
- 36) P. Colavita, G. De Alti, G. Fronzoni, M. Stener and P. Decleva
"Theoretical study of the valence and core photoemission spectra of C_{60} "
Phys. Chem. Chem. Phys. 3 (2001) 4481
- 37) G. Fronzoni, M. Stener, S. Furlan, and P. Decleva
" Theoretical study of the photoionization shape resonances of Cobaltocene and Nickelocene "
Chem. Phys., 273 (2001) 117.
- 38) P. Decleva, S. Furlan, G. Fronzoni and M. Stener
"High energy oscillations in the valence photoionization partial cross section of C_{60} "
Chem. Phys. Lett. 348 (2001) 363.
- 39) M. Stener and P. Decleva,
"The description of the photoionization process by the B-spline density functional method"
in: Recent Advances in Density Functional Methods, Vol. III, V. Barone, A. Bencini and P. Fantucci eds., World Scientific Publishing Company, Singapore 2002.
- 40) Lucio Randaccio, Silvano Geremia, Mauro Stener, Daniele Toffoli and Ennio Zangrando,
"Electronic properties of the axial Co-C and Co-S bonds in B_{12} systems: a density functional study"
Eur. J. In. Chem. (2002) 93.

- 41) D. Toffoli, M. Stener, G. Fronzoni and P. Decleva
"Convergence of the multicenter B-spline DFT approach for the continuum"
Chem. Phys., 276 (2002) 25.
- 42) M. Stener, G. Fronzoni and P. Decleva
"Time Dependent Density Functional Study of the Symmetry Resolved N 1s
Photoionization in N₂"
Chem. Phys. Lett., 351 (2002) 469.
- 43) M. Stener, G. Fronzoni, D. Toffoli, P. Colavita, S. Furlan and P. Decleva
"Valence and core photoemission in M@C₆₀ (M = Be, Mg, Ca)"
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 35 (2002) 1421.
- 44) D. Toffoli, M. Stener and P. Decleva
"Application of the Relativistic Time Dependent Density Functional Theory to the
photoionization of Xenon"
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 35 (2002) 1275.
- 45) M. Stener
"Photoionization of oriented molecules: a time dependent density functional
approach"
Chem. Phys. Lett., 356 (2002) 153.
- 46) D. Toffoli, M. Stener and P. Decleva
"Photoionization of Mercury: a relativistic Time-Dependent-Density Functional
Theory Approach"
Phys. Rev. A 66 (2002) 012501.
- 47) M. Stener, G. Fronzoni, D. Toffoli and P. Decleva
"Time Dependent Density Functional Photoionization of CH₄, NH₃, H₂O and HF"
Chem. Phys., 282 (2002) 337.
- 48) Yoshi-ichi Suzuki, Mauro Stener and Tamar Seideman,
"Theory of time-resolved photoelectron imaging. Nonperturbative calculation for an
internally converting polyatomic molecule"
Phys. Rev. Letters, 89 (2002) 233002.

- 49) Yoshi-ichi Suzuki, Mauro Stener and Tamar Seideman,
“Multidimensional calculation of time-resolved photoelectron angular distribution.
The internal conversion dynamics of pyrazine”
J. Chem. Phys., 118 (2003) 4432.
- 50) G. Fronzoni, M. Stener and P. Decleva
“Dramatic Response Effects in the photoionization of the second row hydrides: a time
dependent density functional investigation”
J. Chem. Phys., 118 (2003) 10051.
- 51) M. Stener, G. Fronzoni and M. de Simone
“ Time Dependent Density Functional Theory of Core Electrons Excitations ”
Chem. Phys. Lett., 373 (2003) 115.
- 52) G. Fronzoni, M. Coreno, M. de Simone, P. Franceschi, C. Furlani, S. Furlan, K. C.
Prince, M. Stener and P. Decleva
“High Resolution Inner-shell Spectroscopy and ab-initio CI calculations on TiCl_4 and
isoelectronic molecules”
Phys. Chem. Chem. Phys, 5 (2003) 2758.
- 53) Giovanni Tautzher, Renata Dreos, Alessandro Felluga, Giorgio Nardin, Lucio
Randaccio and Mauro Stener
“Intramolecular and Intermolecular O-H-O Hydrogen Bond in Some Nickel(II)
Complexes with Tridentate Amino-oxime Ligands”
Inorg. Chim. Acta, 355 (2003) 361-367.
- 54) D. Toffoli, M. Stener and P. Decleva
“3d Photoionization along the Xenon isoelectronic series”
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 36 (2003) 3097.
- 55) Yoshi-ichi Suzuki, Mauro Stener and Tamar Seideman,
“Theory of Time-Resolved Photoelectron Imaging. Comparison of a Density
Functional with a Time-Dependent Density Functional Approach”
J. Chem. Phys., 120 (2004) 1172-1180.

- 56) G. Fronzoni, M. Stener and P. Decleva,
“Valence and core photoionization dynamics of Acetylene by TD-DFT continuum approach”,
Chem. Phys., 298 (2004) 141-153.
- 57) M. Stener, G. Fronzoni, D. Di Tommaso and P. Decleva
“Density Functional study on the Circular Dichroism of photoelectron Angular Distribution from chiral derivatives of oxirane”
J. Chem. Phys., 120 (2004) 3284 – 3296.
- 58) S. Turchini, N. Zema, G. Contini, G. Alberti, M. Alagia, S. Stranges, G. Fronzoni, M. Stener, P. Decleva and T. Prosperi,
“Circular Dichroism in photoelectron spectroscopy of Free Chiral Molecules: Experiment and Theory on Methyl-oxirane”
Phys. Rev. A 70 (2004) 014502-1, 014502-4
- 59) J. Schiessling, M. Stener, T. Balasubramanian, L. Kjeldgaard, P. Decleva, J. Nordgren and P. A. Brühwiler,
“Origin of Molecular Orbital Splitting of C60 on Al(110)”,
J. Phys.: Condens. Matter 16 (2004) L407-L414
- 60) G. Fronzoni, M. Stener, A. Reduce and P. Decleva
“Time Dependent Density Functional Theory Calculations of Ligand K-Edge and Metal L-Edge X-Ray Absorption of a Series of Oxomolybdenum Complexes”
J. Phys. Chem. A, 108 (2004) 8467 – 8477.
- 61) Corrado Crotti, Erica Farnetti, Teresa Celestino, Mauro Stener, and Stefano Fontana,
“Donor properties of diphosphine ligands in tungsten carbonyl complexes: synchrotron radiation XPS measurements and DFT calculations”
Organometallics, 23 (2004) 5219-5225.
- 62) T. Watanabe and M. Stener
“Collisional de-excitation process of excited atoms by axially symmetric molecules”
J. Chem. Phys., 121 (2004) 9948-9958.

63) Alessandro Scarel, Barbara Milani, Ennio Zangrando, Mauro Stener, Sara Furlan, Giovanna Fronzoni, Giovanni Mestroni, Serafino Gladiali, Carla Carfagna and Luca Mosca

“Palladium complexes with 3-alkyl-substituted-1,10-phenanthrolines: effect of the remote alkyl substituent on the CO/olefin copolymerization reactions”
Organometallics, 23 (2004) 5593-5605.

64) M. Stener, G. Fronzoni and R. De Francesco

“ Core excitations in MgO: a DFT study with cluster models ”
Chem. Phys., 309 (2005) 49-58.

65) G. Fronzoni, R. De Francesco and M. Stener

“ Time Dependent Density Functional Theory of X-Ray absorption spectroscopy of alkaline-earth oxides”
J. Phys. Chem. B, 109 (20) (2005) 10332-10340.

66) Anna Giardini, Daniele Catone, Stefano Stranges, Mauro Satta, Mario Tacconi, Susanna Piccirillo, Stefano Turchini, Nicola Zema, Giorgio Contini, Tommaso Prosperi, Pietro Decleva, Devis Di Tommaso, Giovanna Fronzoni, Mauro Stener, Antonello Filippi, Maurizio Speranza

"Angle-Resolved Photoelectron Spectroscopy of Randomly Oriented 3-Hydroxytetrahydrofuran Enantiomers"
Chem. Phys Chem, 6 (2005) 1164-1168

67) M. Stener, G. Fronzoni and P. Decleva

“Time Dependent Density Functional Theory for molecular photoionization with non-iterative algorithm and multicenter B-spline basis set: CS₂ and C₆H₆ case studies”
J. Chem. Phys., 122 (2005) 234301.

- 68) S. Stranges, S. Turchini, M. Alagia, G. Alberti, G. Contini, P. Decleva, G. Fronzoni, M. Stener, N. Zema and T. Prosperi
"Valence Photoionization Dynamics in Circular Dichroism of Chiral Free Molecules: the Methyl-Oxirane"
J. Chem. Phys, 122 (2005) 244303
- 69) G. Fronzoni, M. Stener, P. Decleva, F. Wang, T. Ziegler E. van Lenthe and E. J. Baerends
"Spin-Orbit Relativistic Time Dependent Density Functional Theory calculations for the description of core electron excitations: TiCl_4 case study"
Chem. Phys. Lett., 416 (2005) 56-63.
- 70) P. Decleva, G. Fronzoni, M. Stener, M. de Simone, M. Coreno, J. C. Green, N. Hazari and O. Plekan,
"Strong oscillations in molecular valence photoemission intensities"
Phys. Rev. Letters, 95 (2005) 263401 1-4.
- 71) M. Stener, D. Di Tommaso, G. Fronzoni, P. Decleva and I. Powis
"Theoretical study on the circular dichroism in core and valence photoelectron angular distributions of camphor enantiomers"
J. Chem. Phys., 124 (2006) 024326 1-10.
- 72) M. Stener, D. Toffoli, G. Fronzoni and P. Decleva
"Time Dependent Density Functional study of the photoionization dynamics of SF_6 "
J. Chem. Phys, 124 (2006) 114306 (1-13).
- 73) Devis Di Tommaso, M. Stener, G. Fronzoni, and P. Decleva
"Conformational effects on the Circular Dichroism in the Photoelectron Angular Distribution"
ChemPhysChem, 7 (2006) 924-934.
- 74) D. Toffoli, M. Stener and P. Decleva,
"Photoabsorption and Photoionization dynamics study of Silicon Tetrafluoride in the framework of the Time-Dependent Density-Functional-Theory"
Phys. Rev. A, 73 (2006) 042704 (1-14)

- 75) G. Fronzoni, R. de Francesco, M. Stener, M. Causà',
" X-Ray absorption spectroscopy of titanium oxide by Time Dependent Density Functional calculations "
J. Phys. Chem. B, 110 (2006) 9899-9907.
- 76) D. Toffoli, M. Stener, G. Fronzoni and P. Decleva
"Photoionization Cross Section and Angular Distribution Calculations of Carbon Tetrafluoride"
J. Chem. Phys., 124 (2006) 214313 1-10.
- 77) R. De Francesco, M. Stener, M. Causà, D. Toffoli and G. Fronzoni
"Time Dependent Density Functional investigation of the near-edge absorption spectra of V₂O₅",
Phys. Chem. Chem. Phys., 8 (2006) 4300-4310.
- 78) Jérôme Durand, Ennio Zangrando, Mauro Stener, Giovanna Fronzoni, Carla Carfagna, Barbara Binotti, Paul C. J. Kamer, Christian Müller, Maria Caporali, Piet W. N. M. van Leeuwen, Dieter Vogt, Barbara Milani
"Long Lived Palladium Catalysts for CO/Vinyl Arene Polyketones Synthesis: A Solution to Deactivation Problems"
Chemistry: a European Journal, 12 (2006) 7639 - 7651.
- 79) Corrado Crotti, Erica Farnetti, Serena Filipuzzi, Mauro Stener, Ennio Zangrando and Paolo Moras,
"Evaluation of the Donor Ability of Phenantrolines in Iridium Complexes by Means of Synchrotron Radiation Photoemission Spectroscopy and DFT Calculations",
Dalton Trans. (2007) 133-142.
- 80) J. Adachi, K. Ito, H. Yoshii, M. Yamazaki, A. Yagishita, M. Stener and P. Decleva
"Site-specific photoemission dynamics of N₂O molecules probed by fixed-molecule core-level photoelectron angular distributions"
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 40 (2007) 29-47.

- 81) G. Fronzoni, R. De Francesco, M. Stener and P. Decleva
" Spin-Orbit Relativistic calculations of the core excitation spectra of SO₂"
J. Chem. Phys., 126 (2007) 134308 1-10.
- 82) M. Stener, D. Toffoli, G. Fronzoni and P. Decleva
"Recent advances in molecular photoionization by density functional theory based approaches",
Theor. Chem. Acc., 117 (2007) 943 - 956.
- 83) P Decleva, M Stener, D M P Holland, A W Potts and L Karlsson
" Perfluoro effects in the occupied and virtual valence orbitals of hexafluorobenzene "
J. Phys. B, At. Mol. Opt. Phys., 40 (2007) 2939 - 2959.
- 84) T. Teramoto, J. Adachi, K. Hosaka, M. Yamazaki, K. Yamanouchi, N. A. Cherepkov, M. Stener, P. Decleva and A. Yagishita
" New approach for a complete experiment: C1s photoionization in CO₂ molecules "
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 40 (2007) F241-F250.
- 85) M. Stener, A. Nardelli, R. De Francesco and G. Fronzoni,
"Optical excitations of gold nanoparticles: a quantum chemical scalar relativistic Time Dependent Density Functional study"
J. Phys. Chem. C, 111 (2007) 11862 - 11871.
- 86) G. Fronzoni, R. De Francesco and M. Stener
"TDDFT calculations of NEXAFS spectra of model systems for SO₂ adsorbed on the MgO (100) surface"
J. Phys. Chem. C, 111 (2007) 13554 - 13563.
- 87) T. Teramoto, J. Adachi, M. Yamazaki, K. Yamanouchi , M. Stener, P. Decleva and A. Yagishita
"Extensive study on the C1s photoionization of CS₂ molecules by multi-coincidence velocity-map imaging spectrometry"
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 40 (2007) 4033 - 4046.

88) D. Catone, S. Turchini, G. Contini, N. Zema, S. Irrera, T. Prosperi, M. Stener, D. Di Tommaso, and P. Decleva

"2-amino-1-propanol vs 1-amino-2-propanol: valence band and C 1s core-level photoelectron spectra"

J. Chem Phys., 127 (2007) 144312 (1-10).

89) Sofia Derossi, Massimo Casanova, Elisabetta Iengo, Ennio Zangrando, Mauro Stener, Enzo Alessio

"Self-assembled metallacycles with pyrazine edges: a new example in which the *unexpected* molecular triangle prevails over the *expected* molecular square"

Inorg. Chem., 46 (2007) 11243 - 11253.

90) H. Fukuzawa, X.-J. Liu, T. Teranishi, K. Sakai, G. Prümper, K. Ueda, Y. Morishita, N. Saito, M. Stener and P. Decleva

"Fluorine K-shell photoelectron angular distribution from CF₄ molecules in the molecular frame"

Chem. Phys. Lett., 451 (2008) 182-185.